
Inhalt

1	Lagepeilung	1
1.1	Wozu sind Modelle gut?	1
1.2	Bewertung, was ist das?	3
1.2.1	Erkennen von Gut und Böse	3
1.2.2	Rahmenbedingungen und Einschränkungen beim Bewertungsprozess	4
1.2.3	Vorgehensweise bei einem Bewertungsverfahren (Ranking)	6
1.3	Modellgrundlagen	6
1.3.1	Begriffsklärung	6
1.3.2	Modelleinteilung	7
1.3.3	Modellbeurteilung	8
1.4	Rolle der EDV	10
1.4.1	Programme im Umweltschutzsektor	10
1.4.2	EDV-Sprachen	14
1.4.3	Rolle von Benutzeroberflächen	15
1.5	Anhang	15
1.5.1	Wichtige deutsche Vorgaben	15
1.5.2	EU-Richtlinien	17
2	Grundlagen zur Systemanalyse	19
2.1	Übersicht	19
2.2	Exposition und Wirkung	20
2.3	Wege zur mathematischen Formulierung	20
2.4	Dimensionen und Einheiten	22
2.5	Systemabgrenzung	23
2.5.1	Prinzipien	23
2.5.2	Kompartimentalisierung	25
2.6	Analyse von Gleichungssystemen	26
2.6.1	Integration, stationäre Punkte und Stabilität	26
2.6.2	Zur Lösung von Differentialgleichungen	34
3	Relationen	41
3.1	Äquivalenzrelationen und -klassen	41
3.2	Ordnungsrelationen	44
3.3	Einführung in die Graphentheorie	47
3.3.1	Übersicht	47

3.3.2	Grundbegriffe	48
3.3.3	Weitere Begriffe der Graphentheorie (die zum besseren Verständnis vereinbart werden sollten)	53
4	Chemische Graphentheorie (CGT)	59
4.1	Molekülcodierung	59
4.2	Matrizen in der chemischen Graphentheorie	62
4.3	Topologische Indices	64
4.4	Informationstheoretische Indices	80
5	Automatische Klassifikation	87
5.1	Vorbereitende Bemerkungen	87
5.2	Merkmalsraum	88
5.2.1	Begriffe	88
5.2.2	Distanzen für quantitative Merkmale	88
5.3	Erzeugung von Klassen (Partitionen)	94
5.3.1	Anforderungen	94
5.3.2	Anzahl von Partitionen	94
5.3.3	Darstellung von Partitionen	96
5.4	Agglomerative Verfahren zur Erzeugung von Partitionenhierarchien	101
5.4.1	Konstruktionsprinzip des Single Linkage Verfahrens	101
5.4.2	Andere Clusteranalyse-Verfahren	105
5.5	Minimalbäume	105
5.5.1	Clusteranalyse mit SPSS®	105
5.5.2	Algorithmus zum Single Linkage Verfahren	106
5.5.3	Minimalbaum-Erzeugung	108
5.5.4	Partitionen-Erzeugung	110
6	Daten	113
6.1	Vorbemerkung	113
6.2	Datenquellen und Informationssysteme	113
6.3	Objektmodellierung	118
6.3.1	Aufgabengebiet der Objektmodellierung in der Ökologischen Chemie	118
6.3.2	Relevante Substanzeigenschaften	118
6.3.3	Notationsfragen	119
6.4	Methodenübersicht zur Eigenschaftsabschätzung	122
6.5	Property-Property-Beziehungen (PPR)	127
6.5.1	PPR-Netze	127
6.5.2	Beispiele für die Berechnung einiger Substanzeigenschaften	129
6.5.3	Einzelheiten zur Abschätzung von PPRs für biologische Endpunkte	146
6.6	Struktur-Eigenschaftsbeziehungen	148
6.6.1	Beispiele zur Anwendung von Topologischen Indices	148
6.6.2	Beispiele zur Anwendung von Informationstheoretischen Indices	150
6.6.3	Inverse QSAR	151
6.6.4	QSAR im ökosystemaren Kontext	151

6.7	Einzelheiten zu Fragment-, Substituenten- und De Novo-Verfahren	151
6.7.1	Fragmentverfahren	151
6.7.2	Substituentenmethode	154
6.7.3	Clusteranalyse zur Auswahl von Substituenten	159
6.7.4	De Novo-Ansatz	161
6.7.5	Zusammenfassung zu 6.7	163
7	Exposition: Netzwerkmodelle	165
7.1	Übersicht	165
7.2	Punktuelle und lokale Einträge in die Umwelt	166
7.3	Ein Einzelchemikaliennetzwerk	167
7.4	RLTEC	174
8	Exposition: Gleichgewichts- und Fugazitätsmodelle	181
8.1	EXTND	181
8.1.1	Einleitung	181
8.1.2	Gleichgewichtsverteilungsmodelle	181
8.1.3	Die Partitionskoeffizienten	183
8.1.4	Struktur-Fate-Beziehungen	187
8.1.5	Anwendungsbeispiel mit E4CHEM	189
8.1.6	Bewertung von Chemikalien nach EXTND	192
8.2	Fugazitätsmodelle	194
8.2.1	Einleitung	194
8.2.2	UNIT WORLD nach Mackay	195
8.2.3	Die Fugazität	203
8.2.4	Modellierung von Transportvorgängen	209
8.2.5	Transformationen von Chemikalien	213
8.2.6	Modellierungsansätze zur Beschreibung des mikrobiellen Abbaus	214
8.2.7	Die Levels I bis IV	223
8.2.8	Beispielhafte Berechnungen mit den Fugazitätsmodellen	229
8.2.9	Zusammenfassung zum Konzept der Fugazitätsmodelle	232
9	Exposition: Single-Media-Modelle	235
9.1	Modellierprinzipien	235
9.1.1	Übersicht	235
9.1.2	Räumliche Skalierung	237
9.1.3	Hierarchien	238
9.1.4	Konzept des lokalen Gleichgewichts	239
9.1.5	Advektions-Dispersionsgleichung	243
9.1.6	Einführung in die Inverse Modellierung	249
9.2	Ausbreitung in Flüssen	252
9.2.1	Modellvorstellung	252
9.2.2	Anwendungen des Modells EXWAT	262
9.2.3	Anmerkung zur Modellierung von Totwasserzonen und Bühnenfeldern	271
9.3	System Boden-Pflanze	276
9.3.1	Schadstofftransportmodell im Boden	276

9.3.2	Das E4CHEM-Modul EXSOL	279
9.3.3	Beispiel: Modellierung der Aufnahme von Benzol in die Pflanze	283
9.3.4	Beispiel: Versickerung von Atrazin im Boden	286
10	Wirkung von Chemikalien	293
10.1	Vorbemerkung	293
10.2	Wirkung im ökosystemaren Kontext	293
10.2.1	Kenngrößen	293
10.2.2	Quantitative Spezies-Spezies-Relationen (QSSR)	294
10.2.3	Wirkungsparameter und Bewertungsverfahren	295
10.2.4	Top-Konsumenten	299
10.3	Dynamische Wirkungsmodellierung	301
10.3.1	Das Problem	301
10.3.2	Demographische Modellierung	303
10.3.3	Logistisches Wachstum	309
10.3.4	Lotka Volterra-Systeme	314
10.3.5	Konkurrenzmodellierung	325
10.3.6	Anwendung der Zero-Isoklinen auf die Wirkung von Chemikalien	329
10.3.7	Notwendigkeit umfassenderer Modelle, um Chemikalien zu bewerten	332
10.4	Ökosystemare Modellierung	332
10.4.1	Übersicht	332
10.4.2	Trophie-Ebenen-Ansatz	333
10.4.3	Das Modell ETSYS	335
10.4.4	Das Modell POND	337
10.4.5	Bewertung von Chemikalien aus Modellsicht	345
10.5	Nahrungsnetztopologien	346
10.5.1	Motivation	346
10.5.2	Beispiele binärer Nahrungsnetztopologien	347
10.5.3	Empirische Befunde und Nahrungsnetztopologien	349
10.5.4	Interpretation, Kritikpunkte und Ausblick	353
10.5.5	Dynamische Netze	356
11	Bewertung I: Formale Ranking-Systeme	361
11.1	Einleitung	361
11.2	Kriterienhierarchie	362
11.3	Das Schutzziel „Mensch“	364
11.4	Übersicht über Ranking Systeme	368
11.5	Wassergefährdungsklassen (WGK)	370
11.6	Das CHEMS-1 Verfahren	373
11.6.1	Einleitung	373
11.6.2	Datenanforderungen	374
11.6.3	Algorithmus und zusammenfassende Bewertung des Verfahrens	377
11.7	Nutzwerttheorie	383
11.8	Speziellere Verfahren aus Operation Research und Umweltökonomie	387

11.8.1	Kosten-Nutzen-Ansatz	387
11.8.2	Das AHP-Verfahren	389
11.8.3	PROMETHEE-Verfahren	399
12	Bewertung II: Ordnungs- und Verbandstheorie	409
12.1	Hasse-Diagrammtechnik (HDT)	409
12.1.1	Einführung	409
12.1.2	Das Problem der Sortierung	409
12.1.3	Darstellung der Hasse-Diagrammtechnik (HDT)	411
12.1.4	Beispiel einer vergleichenden Bewertung von schadstoffbelasteten Regionen	420
12.1.5	Bewertung von Chemikalien	422
12.1.6	„Bewertung der Bewertung durch HDT“	424
12.1.7	Zusammenfassende Beurteilung der HDT	427
12.2	Formale Begriffsanalyse (FBA)	436
12.2.1	Motivation	436
12.2.2	Vom „Kontext“ zu „Begriffen“	438
12.2.3	Vom Kontext zum Diagramm der Verbandstheorie	442
12.2.4	Anwendung der FBA auf Chemikalien	446
12.2.5	Zusammenfassende Bewertung der FBA	448
13	Bewertung III: Nutzung von Simulationsmodellen	451
13.1	Einführung	451
13.2	Bewertung durch das E4CHEM-Verfahren	453
13.3	Bewertung durch EUSES	463
13.3.1	Übersicht	463
13.3.2	Einzelheiten zu EUSES	464
13.3.3	Anmerkungen zu Berechnungen mit EUSES	469
13.3.4	Bewertung von EUSES	472
14	Vergleich der Bewertungssysteme	475
14.1	Einführung	475
14.2	Vergleichskriterien	475
14.3	Ergebnis	476
14.3.1	Umfang des externen Wissens	476
14.3.2	Nutzung des naturwissenschaftlichen Hintergrunds	477
14.3.3	Algorithmus für die Erstellung des Rankings	478
14.3.4	Sensitivitätsanalyse	479
14.3.5	Umgang mit fehlenden Daten	480
14.3.6	Regelung des Datenzugriffs	480
15	Ausblick	483
16	Übersicht über Software	487
16.1	Beigefügte Software	487
16.2	Nicht beigefügte Software	488

17	Literatur	491
17.1	Auf den Text bezogene Literaturstellen	491
17.2	Nützliche Literaturstellen für vertiefende Studien	507
17.2.1	Numerische Verfahren, Mathematik	507
17.2.2	Datenabschätzung	507
17.2.3	Exposition	508
17.2.4	Wirkung	508
17.2.5	Bewertung	509
17.3	Empfehlenswerte Bücher	509
	Sachverzeichnis	513